

Estudo por espectrometria de massas “electrospray” de ligantes e complexos de cromo(III) com bases de Schiff tetradentadas.

Pedro Esteves Aranha¹(IC)*, Edward Ralph Dockal¹ (PQ), Edson Rodrigues Filho¹ (PQ), Mirian Paula dos Santos¹(PG), Sandra Romera¹(PG)

*peaaranha@polvo.ufscar.br

1- UFSCar – Centro de Ciências Exatas e Tecnologia – Departamento de Química

Palavras Chave: espectrometria de massas, cromo(III), bases de Schiff

Introdução

As bases de Schiff são muito utilizadas como reagentes analíticos uma vez que possibilitam determinações simples e não dispendiosas de muitas substâncias inorgânicas, além de produzirem complexos metálicos estáveis. A reatividade de complexos metálicos tem sido investigada em nível de laboratório como um ponto de partida para novas vias sintéticas de produtos orgânicos e para auxiliar na compreensão de diversos processos biológicos. Na indústria a reatividade destes compostos tem contribuído para a obtenção de produtos químicos em larga escala. Realizou-se um estudo de caracterização para os ligantes e complexos de cromo(III) com bases de Schiff por espectrometria de massas “electrospray”, quatro ligantes: (Salen), (5-Cl salen), (5-Brsalen) e (5-NO₂salen) e quatro complexos: Cr(III)(Salen), Cr(III)(5-Clsalen), Cr(III)(5-Brsalen) e Cr(III)(5-NO₂salen) foram inicialmente estudados em soluções de 15 ng/mL em DMSO.

Resultados e Discussão

Do espectro de massas ESI/EM, modo negativo, para o ligante (Salen) observou-se o pico do pseudo-íon molecular a m/z 267 $[M-H]^-$, para o ligante (5-Clsalen) o espectro de massas ESI/EM, modo positivo, observou-se o pico do íon molecular a m/z 337 $[M]^+$, o ligante (5-Brsalen) o espectro de massas ESI/EM, modo negativo, observou-se o pico do pseudo-íon molecular a m/z 425 $[M-H]^-$, no espectro de massas ESI/EM, modo positivo, do ligante (5-Nitrosalen) observou-se o pseudo-íon molecular a m/z 359 $[M+H]^+$.

Pelos espectros de massa dos complexos, observou-se a coordenação de duas moléculas do solvente DMSO nas posições axiais do centro metálico. Para o complexo $[Cr(III)(Salen)(DMSO)_2]^+$ o espectro de massas ESI/EM, modo positivo, observou-se o pico do íon molecular a m/z 474. Para o complexo $[Cr(III)(5-Clsalen)(DMSO)_2]^+$ o espectro de massas ESI/EM, modo positivo, observou-se o pico do íon molecular a m/z 544. O complexo $[Cr(III)(5-Brsalen)(DMSO)_2]^+$ o espectro de massas ESI/EM, modo positivo, observou-se o pico do íon molecular a

m/z 633. O complexo $[Cr(III)(5-Nitrosalen)(DMSO)_2]^+$ o espectro de massas ESI/EM, modo positivo, observou-se o pico do íon molecular a m/z 564. A coordenação de moléculas de solvente no centro metálico já é conhecida^[1-3].

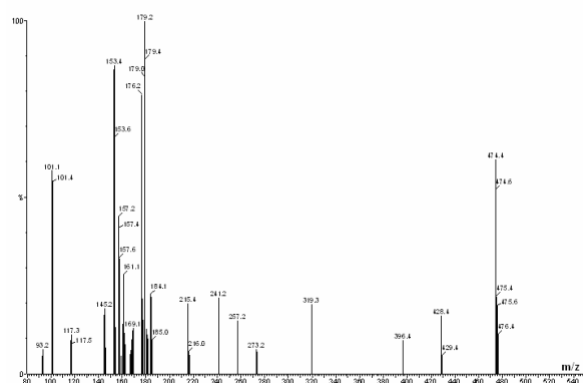


Figura 1. Espectro de massas ESI/EM modo positivo para o complexo Cr(III)(Salen) em solvente DMSO concentração 15ng/mL.

Conclusões

Baseados nos espectros de massas para esses ligantes e complexos conclui-se que os complexos obtidos são na realidade, compostos do tipo $[Cr(III)(Base\ de\ Schiff)(DMSO)_2]^+$ e não do tipo $[Cr(III)(Base\ de\ Schiff)(H_2O)_2]^+$ ou $[Cr(III)(Base\ de\ Schiff)(OH)(H_2O)]$, sendo que essa coordenação do solvente leva a alterações nas transições internas do centro metálico.

Agradecimentos

Ao Prof. Dr. Miguel G. Neumann, Dra. Carla C. S. Cavalheiro e ao Dr. Eder T. G. Cavalheiro do Instituto de Química da USP São Carlos (IQSC) pela disponibilização dos equipamentos em seu laboratório. A FAPESP, CNPq e CAPES pelo suporte financeiro a essa pesquisa.

¹ Kumar, M. K.; Prabhakar, S.; Kumar, M. R.; Reddy, T. J.; Premisingh, S.; Rajagopal, S.; Vairamani, M.; *Rapid Commun. Mass Spectrom.*, **2004**, 18, 1103.

² Chipperfield, J. R.; Clayton, J.; Khan, S.J.; Woodward, S.; *J. Chem. Soc., Dalton Trans.*, **2000**, 1087.

³ Katta, V.; Choudhury, S. K.; Chait, B. T.; *J. Am. Chem. Soc.*, **1990**, 112, 5348.